集団遺伝学に現れる退化放物型偏微分方程式に対する数値：数式ハイブリッド法(数式処理における理論とその応用の研究)

天野, 一男

数理解析研究所講究録
920 巻 1995 年 89-100

10.

集団遺伝学に現れる退化放物型偏微分方程式に対する数値ー数式ハイブリッド法

城西大学理学部 天 野 一 男
(Kazuo Amano)

Abstract. 著者の目的は、集団遺伝学に現れる退化放物型偏微分方程式の近似的な一般解を構成することである。彼の提唱する手法は、数値解析的な手法と数式処理的なそれとの融合を図ることによって、新しい可能性が生まれることを示唆している。

10.1 序

良く知られているように、偏微分方程式の厳密な一般解が計算で求められるのは、非常に運の良い場合に限られる。常微分方程式の一般解が任意定数を含んでいるように、偏微分方程式の一般解は任意関数を含んだ形で求められる。残念ながら研究者達は、既に偏微分方程式の一般解の研究には興味を失ってしまっているように見受けられる。このノートにおいてわれわれは、厳密な一般解ではなく近似的な一般解に眼を転じることによって、偏微分方程式の一般解の研究に新たな可能性が見えてくることを示したいと考えている。

われわれは、集団遺伝学に現れる退化放物型偏微分方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\big(V(x)u\big)-\frac{\partial}{\partial x}\big(M(x)u\big)\qquad(t>0,\ 0<x<1)\tag{1}$$

の近似的な一般解を構成する。ここで、$V(x)=\dfrac{x(1-x)}{2N}$ かつ $M(x)$ は x の実係数多項式で、$N\in\{1,2,3,\cdots\}$ は effective population number を表す。Crow-Kimura ([2]) は、(1) の厳密解の構成の研究を

行い、幾つかの具体的に与えられた $M(x)$ に対しては、特殊関数を用いた一般解の表現を得ることに成功した。われわれの目的は、一般の $M(x)$ に対して、近似的な一般解を構成することである。

10.2 準備

補題 10.2.1. 任意の自然数 n と任意の C^{n+1} 級関数 $u(t,x)$ に対して、

$$
\begin{aligned}
u(t+h, x+k) &= \sum_{\nu=0}^{n} \frac{1}{\nu!}\left(h\frac{\partial}{\partial t} + k\frac{\partial}{\partial x}\right)^{\nu} u(t,x) \\
&+ \int_0^1 \frac{(1-\theta)^n}{n!}\left(h\frac{\partial}{\partial t} + k\frac{\partial}{\partial x}\right)^{n+1} u(t+\theta h, x+\theta k)\, d\theta \qquad (2)
\end{aligned}
$$

が成り立つ。

この補題は、微分積分学の基本定理と部分積分から従う。

われわれは、偏微分作用素 A を次式で定義する。

$$
A = \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Big(V(x)u\Big) - \frac{\partial}{\partial x}\Big(M(x)u\Big) \qquad (3)
$$

集団遺伝学においては、偏微分方程式

$$
\frac{\partial u}{\partial t} = Au \qquad \text{in} \quad (0, NT) \times (0,1) \qquad (4)
$$

に対する、初期値問題を解き、その減衰の様子を調べることが必要とされる。ここで、T は正の定数である。

補題 10.2.2.

$$
a(x) = \frac{x(1-x)}{2}, \quad b(x) = \frac{1-2x}{2} - N\,M(x), \quad c(x) = -N\,M'(x) \qquad (5)
$$

とおき、偏微分作用素 B を次式で定義する。

$$
B = \frac{1}{2}a(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2} + b(x)\frac{\partial}{\partial x} + c(x) \qquad (6)
$$

このとき、$v(t,x)$ が偏微分方程式

$$\frac{\partial v}{\partial t} = Bv \qquad \text{in} \quad (0,T)\times(0,1) \tag{7}$$

の解であれば、

$$u(t,x) = \exp\Big(-\frac{t}{2N}\Big)\, v\Big(\frac{t}{N}, x\Big) \tag{8}$$

は (4) の解である。

証明. 直接計算により、

$$\begin{aligned} Au &= \frac{1}{2}\frac{x(1-x)}{2N}\,u_{xx} + \Big(\frac{1-2x}{2N} - M\Big)\,u_x - \Big(\frac{1}{2N} + M'\Big)\,u \\ &= \frac{1}{N}\Big(\frac{1}{2}a(x)\,u_{xx} + b(x)\,u_x + c(x)\,u - \frac{1}{2}\,u\Big) \\ &= \frac{1}{N}(Bu - \frac{1}{2}\,u) \end{aligned}$$

を得る。したがって、$v(t,x)$ が (7) の解であれば、

$$u(t,x) = \exp\Big(-\frac{t}{2N}\Big)\, v\Big(\frac{t}{N}, x\Big)$$

に対して、

$$\begin{aligned} u_t &= \frac{1}{N}\exp\Big(-\frac{t}{2N}\Big)\,v_t - \frac{1}{2N}\exp\Big(-\frac{t}{2N}\Big)\,v \\ &= \frac{1}{N}\exp\Big(-\frac{t}{2N}\Big)\,Bv - \frac{1}{2N}\exp\Big(-\frac{t}{2N}\Big)\,v \\ &= \frac{1}{N}(Bu - \frac{1}{2}\,u) \\ &= Au \end{aligned}$$

がなりたつ。(証明終り)

補題 10.2.3. $u(t,x)$ は (7) の解とする。このとき、

$$0 < h \ll 1,\ 0 \le x \pm \sqrt{a(x)}h \le 1,\ 0 \le x + b(x)h^2 \le 1,\ t - h^2 \ge 0 \tag{9}$$

ならば、

$$u(t,x) = Lu(t,x) - h^4 Ru(t,x) \tag{10}$$

がなりたつ。ここで、

$$\begin{aligned} &Lu(t,x) \\ &= \frac{1}{6}\,u\Big(t, x + \sqrt{a(x)}\,h\Big) + \frac{1}{6}\,u\Big(t, x - \sqrt{a(x)}\,h\Big) \end{aligned} \tag{11}$$

$$+ \quad \frac{1}{3}u\big(t, x + b(x)h^2\big) + \frac{1}{3}u(t - h^2, x) + \frac{h^2}{3}c(x)u(t,x)$$

かつ

$$\begin{aligned} & Ru(t,x) \\ = \quad & \frac{1}{3}\int_0^1 \Big\{ \frac{a^2(x)\,(1-\theta)^3}{12}\Big(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\big(t, x + \sqrt{a(x)}\,\theta h\big) + \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\big(t, x - \sqrt{a(x)}\,\theta h\big)\Big) \\ + \quad & b^2(x)\,(1-\theta)\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x + b(x)\,\theta h^2) + (1-\theta)\,\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t - \theta h^2, x)\Big\}\,d\theta \end{aligned} \tag{12}$$

証明. (2) より、

$$\begin{aligned} & u\big(t, x \pm \sqrt{a(x)}h\big) \\ & = u(t,x) \pm h\,a^{1/2}(x)\frac{\partial u}{\partial x}(t,x) \\ & + \frac{h^2}{2}\,a(x)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x) \pm \frac{h^3}{6}\,a^{3/2}(x)\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(t,x) \\ & + \frac{h^4}{6}\,a^2(x)\int_0^1 (1-\theta)^3\,\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\big(t, x \pm \theta\sqrt{a(x)}h\big)\,d\theta \end{aligned}$$

が得られるので、

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}u\big(t, x + \sqrt{a(x)}\,h\big) + \frac{1}{2}u\big(t, x - \sqrt{a(x)}\,h\big) \\ & = u(t,x) + \frac{h^2}{2}\,a(x)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x) \\ & + \frac{h^4}{12}\,a^2(x)\int_0^1 (1-\theta)^3\,\Big(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\big(t, x + \theta\sqrt{a(x)}\,h\big) + \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\big(t, x - \theta\sqrt{a(x)}\,h\big)\Big)\,d\theta \end{aligned}$$

が従う。さらに、(2) より次の二式が導かれる。

$$\begin{aligned} & u(t, x + b(x)h^2) \\ & = u(t,x) + h^2 b(x)\frac{\partial u}{\partial x}(t,x) \\ & + h^4 b^2(x)\int_0^1 (1-\theta)\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x + \theta\,b(x)h^2)\,d\theta\ , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & u(t - h^2, x) \\ & = u(t,x) - h^2\frac{\partial u}{\partial t}(t,x) \\ & + h^4\int_0^1 (1-\theta)\,\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t - \theta h^2, x)\,d\theta\ . \end{aligned}$$

一方、(7) より、

$$\frac{1}{2}a(x)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b(x)\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial t} = -c(x)u$$

がなりたつ。よって、

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2}u\big(t, x + \sqrt{a(x)}\,h\big) + \frac{1}{2}u\big(t, x - \sqrt{a(x)}\,h\big) + u(t, x + b(x)h^2) + u(t - h^2, x) \\ & = 3u(t,x) - h^2 c(x)u(t,x) \end{aligned}$$

$$+h^4\left\{\frac{a^2(x)}{12}\int_0^1(1-\theta)^3\left(\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\big(t,x+\theta\sqrt{a(x)}\,h\big)+\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\big(t,x-\theta\sqrt{a(x)}\,h\big)\right)d\theta\right.$$
$$\left.+b^2(x)\int_0^1(1-\theta)\,\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x+\theta\, b(x)h^2)\,d\theta+\int_0^1(1-\theta)\,\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t-\theta h^2,x)\,d\theta\right\}$$

が得られる。(証明終り)

等式 (10) より、

$$\begin{aligned} u(t,x) &= \frac{1}{6}u\big(t,x+\sqrt{a(x)}\,h\big)+\frac{1}{6}u\big(t,x-\sqrt{a(x)}\,h\big)\\ &+ \frac{1}{3}u\big(t,x+b(x)h^2\big)+\frac{1}{3}u(t-h^2,x)+\frac{h^2}{3}c(x)u(t,x)+O(h^4) \end{aligned} \tag{13}$$

が従う。この等式を再帰的に用いて、われわれの近似一般解が構成される。

10.3 数値ー数式ハイブリッド法

集団遺伝学への応用上の一般性を失うことなく、われわれは

$$\begin{aligned} &b(x)\ge 0 \quad \textit{in a neighborhood of } 0 \textit{ in } [0,1]\\ &b(x)\le 0 \quad \textit{in a neighborhood of } 1 \textit{ in } [0,1] \end{aligned} \tag{14}$$

と仮定する。この節を通して、$u(t,x)$ は (7) の古典解とし、h は十分に小さな正の定数とする。(13) を、$u(t,x)$ を含む項に対して二回再帰的に適用することによって、われわれは

$$\begin{aligned} &u(t,x)\\ &=\left(1+\frac{h^2}{3}c(x)+\frac{h^4}{9}c^2(x)\right)\left(\frac{1}{6}u\big(t,x+\sqrt{a(x)}\,h\big)+\frac{1}{6}u\big(t,x-\sqrt{a(x)}\,h\big)\right.\\ &\left.+\frac{1}{3}u\big(t,x+b(x)h^2\big)+\frac{1}{3}u(t-h^2,x)\right)+O(h^4) \end{aligned} \tag{15}$$

を得る。

関数 $\varepsilon(x)$ を次式で定義する。

$$\varepsilon(x)=\begin{cases} h & \text{if } \ h^2\le x\le 1-h^2 \ \text{ or } x=0,\ 1\\[2ex] \dfrac{x}{\sqrt{a(x)}} & \text{if } \ 0<x<h^2\\[2ex] \dfrac{1-x}{\sqrt{a(x)}} & \text{if } \ 1-h^2<x<1 \end{cases}$$

明らかに、$0 \leq x \leq 1$ に対して、

$$x \pm \sqrt{a(x)}\,\varepsilon(x),\ x + b(x)\,\varepsilon^2(x) \in [0,1]$$

がなりたつ。

補題 10.3.1. $0 < h \ll 1$ ならば、

$$h^2 \leq x \leq 1 - h^2 \quad implies \quad \frac{h^2}{4} \leq x \pm \sqrt{a(x)}\,h \leq 1 - \frac{h^2}{4} \tag{16}$$

証明. はじめに、

$$f(x) = x - \sqrt{a(x)}\,h - \frac{h^2}{4} = x - \sqrt{\frac{x(1-x)}{2}}\,h - \frac{h^2}{4}$$

とおく。計算により、

$$f'(x) > 0 \quad for \quad \frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2h^2+4}} < x \leq 1\ ,$$

$$f(h^2) > 0\ , \quad h^2 > \frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{2h^2+4}}$$

を得る。よって、

$$f(x) > 0 \quad for \quad h^2 \leq x \leq 1$$

即ち

$$x \pm \sqrt{a(x)}\,h \geq \frac{h^2}{4} \quad for \quad h^2 \leq x \leq 1$$

が従う。同様にして、

$$x \pm \sqrt{a(x)}\,h \leq 1 - \frac{h^2}{4} \quad for \quad 0 \leq x \leq 1 - h^2$$

が得られる。(証明終り)

補題 10.3.2. $0 < h \ll 1$ ならば、

$$\frac{h^2}{4} \le y \le 1 - \frac{h^2}{4} \quad implies \quad \varepsilon(y) \ge \frac{h}{\sqrt{2}} . \tag{17}$$

証明. $\varepsilon(x)$ の定義より、$\frac{h^2}{4} \le y < h^2$ と $1 - h^2 < y \le 1 - \frac{h^2}{4}$ に対して、本補題を証明すれば十分である。

$$g(y) = \varepsilon^2(y) = \frac{2y}{1-y} \quad for \quad \frac{h^2}{4} \le y \le h^2$$

とおく。

$$g'(y) > 0 \quad for \quad \frac{h^2}{4} \le h \le h^2$$

なので、

$$\min_{h^2/4 \le y \le h^2} g(y) = g\left(\frac{h^2}{4}\right) = \frac{2h^2}{4-h^2} \ge \frac{h^2}{2}$$

を得る。これより

$$\varepsilon(y) \ge \frac{h}{\sqrt{2}} \quad for \quad \frac{h^2}{4} \le y < h^2$$

が従う。同様にして、

$$\varepsilon(y) \ge \frac{h}{\sqrt{2}} \quad for \quad 1 - h^2 < y \le 1 - \frac{h^2}{4}$$

（証明終り）

近似一般解を構成するために、差分作用素 M を等式

$$Mf(t,x) = \begin{cases} \left(1 + \frac{\varepsilon^2(x)}{3}c(x) + \frac{\varepsilon^4(x)}{9}c^2(x)\right) & \\ \times\left(\frac{1}{6}f\left(t, x + \sqrt{a(x)}\,\varepsilon(x)\right) + \frac{1}{6}f\left(t, x - \sqrt{a(x)}\,\varepsilon(x)\right)\right. & \\ \left. + \frac{1}{3}f\left(t, x + b(x)\varepsilon^2(x)\right) + \frac{1}{3}f(t - \varepsilon^2(x), x)\right) & \text{if } t \ge h^2 \\ & \\ f(t,x) & \text{if otherwise} \end{cases} \tag{18}$$

で定義する。

関数 $p_k(t,x;s,y)$, $k = 0,1,2,\cdots$ を以下のようにして定義する：

$$p_0(t,x;s,y) = \begin{cases} 1 & \text{if } (s,y) = (t,x) \\ \\ 0 & \text{otherwise}, \end{cases} \tag{19}$$

$$p_1(t,x;s,y) = \begin{cases} \frac{1}{6}\left(1 + \frac{\varepsilon^2(x)}{3}c(x) + \frac{\varepsilon^4(x)}{9}c^2(x)\right) & \text{if } (s.y) = \left(t, x \pm \sqrt{a(x)}\,\varepsilon(x)\right) \\ \frac{1}{3}\left(1 + \frac{\varepsilon^2(x)}{3}c(x) + \frac{\varepsilon^4(x)}{9}c^2(x)\right) & \text{if } (s.y) = \left(t, x + b(x)\,\varepsilon^2(x)\right) \\ \frac{1}{3}\left(1 + \frac{\varepsilon^2(x)}{3}c(x) + \frac{\varepsilon^4(x)}{9}c^2(x)\right) & \text{if } (s.y) = \left(t - \varepsilon^2(x), x\right) \\ 0 & \text{otherwise}. \end{cases} \tag{20}$$

そして $p_{k+1}(t,x;s,y)$ $(k \geq 1)$ は、$D = [0,\infty] \times [0,1]$ 上で定義された任意の関数 $f(t,x)$ に対して、等式

$$\int_D f(s,y)\, p_{k+1}(t,x;ds,dy) = \int_D Mf(s,y)\, p_k(t,x;ds,dy) \tag{21}$$

$$\left(\quad i,e,, \quad \sum_{(s,y)\in D} f(s,y)\, p_{k+1}(t,x;s,y) = \sum_{(s,y)\in D} Mf(s,y)\, p_k(t,x;s,y) \quad \right) \tag{22}$$

を満足する関数として定義される。ここで、$p_{k+1}(t,x;s,y)$ が $p_k(t,x;s,y)$ から一意的に決まることは、明らかである。

(19) より

$$u(t,x) = \int_D p_0(t,x;ds,dy)\, u(s,y)\ , \tag{23}$$

$\varepsilon^4(x) = O(h^4)$ と (20) により、

$$u(t,x) = \int_D p_1(t,x;ds,dy)\, u(s,y) + O(h^4)\ , \tag{24}$$

さらに、(21) より

$$\begin{aligned} &u(t,x) \\ &= \int_D p_1(t,x;ds,dy)\, u(s,y) + O(h^4) \end{aligned}$$

$$= \int_D p_1(t,x;ds,dy)\big(Mu(s,y)+O(h^4)\big)+O(h^4) \tag{25}$$
$$= \int_D p_2(t,x;ds,dy)\,u(s,y)+O(h^4)2$$

が従う。われわれは、このような計算を帰納的に繰り返すことができる。

定理 10.3.3. $u(t,x) \in C^4([0,\infty)\times[0,1])$ は (7) の古典解とする。このとき、任意の $k=0,1,2,\cdots$ に対して、

$$u(t,x) = \int_{0\le s\le t,\ 0\le y\le 1} p_k(t,x;ds,dy)\,u(s,y)+O(h^4)k\ . \tag{26}$$

ここで、$O(h^4)$ は k には依存しない。

(26) において、$u(s,y)$, $0\le s<h^2$ を与えられた初期条件 $\phi(y)$ で置き換えることによって、われわれは次の定理を得る。

定理 10.3.4. $u(t,x)\in C^4([0,\infty)\times[0,1])$ は、退化放物型偏微分方程式 (7) の古典解で、初期条件

$$u(0,x)=\phi(x) \qquad (0<x<1) \tag{27}$$

を満足するものと仮定する。このとき、任意の $k\gg 1$ に対して、

$$\begin{aligned} &u(t,x)\\ &= \int_{0\le s<h^2,\ 0\le y\le 1} p_k(t,x;ds,dy)\,\phi(y)+O(h^2) \qquad (28)\\ &+O(1)\sum_{\ell=0}^{k_0}\binom{k}{\ell}\left(\frac{1}{3}\right)^{\ell}\left(\frac{2}{3}\right)^{k-\ell}+O(h^4)k\ . \end{aligned}$$

ここで、k_0 は $2t/h^2$ 以上の最小整数であり、$O(1)$, $O(h^2)$ と $O(h^4)$ は k に依存しない。

よって、われわれの目標である近似一般解

$$u(t,x)\sim\int_{0\le s<h^2,\ 0\le y\le 1} p_k(t,x;ds,dy)\,\phi(y) \tag{29}$$

が得られた。

証明. (26) によれば、

$$\begin{aligned} &u(t,x)\\ &= \int_{0\le s<h^2,\ 0\le y\le 1} p_k(t,x;ds,dy)\,\phi(y)+O(h^2) \qquad (30) \end{aligned}$$

$$+\int_{h^2\le s\le 1,\ 0\le y\le 1} p_k(t,x;ds,dy)\,u(s,y)+O(h^4)k\ .$$

$p_k(t,x;s,y)$ の定義を見れば、(16) と (17) により、

$$\begin{aligned}&\left|\int_{h^2\le s\le 1,\ 0\le y\le 1} p_k(t,x;ds,dy)\,u(s,y)\right|\\ &\le C_1\int_{h^2\le s\le 1,\ 0\le y\le 1} p_k(t,x;ds,dy)\\ &\le C_2\sum_{\ell=0}^{k_0}\binom{k}{\ell}\left(\frac{1}{3}\right)^{\ell}\left(\frac{2}{3}\right)^{k-\ell}\ .\end{aligned}\tag{31}$$

ここで、 C_i $(i=1,2)$ は k に依存しない正の定数である。(証明終り)

線形結合

$$\int_{0\le s\le t,\ 0\le y\le 1} p_k(t,x;ds,dy)\,u(s,y)=q_1u(t_1,x_1)+q_2u(t_2,x_2)+\cdots+q_nu(t_n,x_n)$$

をリスト

$$\big((q_1\ t_1\ x_1)\ (q_2\ t_2\ x_2)\ \cdots\ (q_n\ t_n\ x_n)\big)$$

と同一視すれば、上記の定理の主要部分は次のようなシンボリックなリスト演算に翻訳される。

Reduce Program.

```
procedure hybrid_method(t, x, n);
begin;
   list_in := {{1, t, x}};
   list_tmp := {};
   while n > 0 do
   <<
      while length(list_in) > 0 do
      <<
         tmp := first(list_in);
         p := first(tmp);
         s := first(rest(tmp));
         y := first(rest(rest(tmp)));
         q := (1+h**2*c(y)/3+h**4*c(y)**2/9)*p;
         if domain_p(s) neq 0 then
         <<
```

```
        list_tmp := cons({q/6, s, y+sqrt(a(y))*h}, list_tmp);
        list_tmp := cons({q/6, s, y-sqrt(a(y))*h}, list_tmp);
        list_tmp := cons({q/3, s, y+b(y)*h**2}, list_tmp);
        list_tmp := cons({q/3, s-h**2, y}, list_tmp)
      >>
      else
        list_tmp := cons({p, s, y}, list_tmp);
      list_in := rest(list_in)
    >>;
    list_in := list_tmp;
    list_tmp := {};
    n := n-1
  >>;
  return list_in
end;
```

ここで、 domain_p(t) は $[0,\infty)$ で定義された、次のような関数である：

$$\text{domain\_p(t)} = \begin{cases} 1 & \text{if } t \geq h^2 \\ 0 & \text{otherwise .} \end{cases}$$

関数 $a(x)$, $b(x)$ と $c(x)$ は (5) で定義された係数である。厳密には、上述の Reduce Program のメインループの各ステップごとに、

$$y \pm \sqrt{a(y)}\,h,\ y + b(y)\,h^2 \in [0,1]$$

を満足するように、パラーメータ h を適当に修正しなければならない。

参考文献

[1]K. Amano, Numerical-symbolic hybrid method for biharmonic Dirichlet problem, (*to appear*).

[2]J. F. Crow and M. Kimura, An Introduction to Population Genetics Theory,
, 1970.

[3]W. J. Ewens, Mathematical Population Genetics, , 1989.

[4]A. C. Hearn, REDUCE User's Manual, version 3.5, , CP78(Rev. 7/94), 1994.

[5]O. A. Oleinik and E. V. Radkevich, Second Order Equations with Nonnegative Characteristic Form,

, 1973.